Index

Commentationes et Relationes

ADAMSON, A. W., s. MARTIN, J. E. 119

BALLHAUSEN, C. J., s. COPELAND, D. A. 317
BONACCORSI, R., PETRONGOLO, C., SCROCCO, E., TOMASI, J.: Theoretical Investigations on the Solvation Process. I. A Simple Model for the Dimeric Water Associate 331
BOSSA, M., DAMIANI, A., FIDENZI, R., GIGLI, S., LELI, R., RAMUNNI, G.: EHT and CNDO/2 Calculations on Amino Terminal Peptides 299
BOYD, D. B.: Near-Minimum Basis Set SCF Calculations on HCl as a Source of Transferable Parameters 273
BREEN, D., s. FLURRY, R. L., JR., et al. 371

ČÁRSKY, P., ZAHRADNÍK, R.: Conjugated Radicals. XII. CNDO Calculations on the Electronic Spectra of Butadiene Cation and Anion Radicals 343
CHEN, S. N., s. PORTER, G. B., et al. 81
CHESNUT, D. B., WORMER, P. E. S.: The TCNE-Benzene Complex: A CNDO Approach 250
COLOMBETTI, G., PETRONGOLO, C.: An Iterative Extended Hückel Calculation for Some Amino Acids Containing Sulphur and Selenium 31
COPELAND, D. A., BALLHAUSEN, C. J.: An Unrestricted CNDO-MO Calculation of VCl_4 . . 317

DAMIANI, A., s. BOSSA, M., et al. 299
DAVIS, R. E., PFAFFENBERGER, C. R. C.: The Carbonyl Frequency of Cyclopentanone as a Function of Its Distortion, a Vibrational Model for 2- and 7-Norbornanone 364

EHRENSON, S., SELTZER, S.: On CNDO Bond Indices and Relations to Molecular Energies 17

FIDENZI, R., s. BOSSA, M., et al. 299
FLURRY, R. L., JR., BREEN, D., HOWLAND, D. L.: Overlap Partitioning as a Tool for Predicting Molecular Rearrangements 371
FORSTER, L. S., s. SHEPARD, W. N. 135
FRATEV, F., s. TYUTYULKOV, N., et al. 385
FRENKEL, E., s. HANSEN, K. H. 105

GAMBA, A., TANTARDINI, G. F., SIMONETTA, M.: The Application of MIM Method to Spiroconjugated Systems 12
GAUSMANN, H., s. PORTER, G. B., et al. 81
GIESSNER-PRETTRE, C., PULLMAN, A.: Configuration Mixing Involving σ and π Orbitals. IV. Introduction of the Neglected Configurations by Second-Order Perturbation Theory 378
GIGLI, S., s. BOSSA, M., et al. 299
GORALSKI, C. T., NEELY, W. B.: The Correlation of NMR Chemical Shifts with EHT Calculated Electron Densities for 3-Pyridinols 41
GRIMISON, A.: Theoretical Treatment of Overcrowding in Phenanthrene 263

HAMMOND, G. S., s. WASGESTIAN, H. F. 186
HANSEN, AA. E., SVENDSEN, E. N.: On the Importance of Scale and Polarization of the Atomic Orbital Basis for LCAO Calculations of Electronic Intensities 303
HANSEN, K. H., FRENKEL, E.: Spinvalenzrechnung an Molekülen AH_n. I. Molekülgeometrie bei einer Valenzstruktur 105
HARRIS LOEW, G.: Energy-Conformation Studies of HCN, HNC and CN^-: A Comparison of Results from EH-SCC and SCF Molecular Orbital Calculations 203
HARTMANN, H., PAPULA, L., STREHL, W.: Zusammenhang zwischen den K_α-Satelliten-Linien und den Röntgenübergängen vom Typ $K^1 L^1 \rightarrow L^2$ bei den Elementen Neon, Natrium, Magnesium, Aluminium und Silizium 243
HIRST, D. M.: INDO-MO Calculations of Hyperfine Splitting Constants for Pyridine Anions 292
— Calculation of ^{14}N Hyperfine Coupling Constants by the INDO-MO Method 409
HOWLAND, D. L., s. FLURRY, R. L., JR., et al. 371

IVANOVA, M., s. TYUTYULKOV, N., et al. 385

JAGER, G. DE, DE JONG, J., MACLEAN, C., ROS, P.: Calculation of Two-Center Zero-Field Splitting Integrals 57
JONG, J. DE, s. JAGER, G. DE, et al. 57

KESTEN, Y., s. MEYER, A. Y. . . . 352
KIRK, A. D.: On Concentration Self-Qenching of Chromium Phosphorescence in $K_3[Cr_xCo_{1-x}(CN)_6]$ Mixed Crystals . . . 113
KOBAYASHI, T., s. YOSHIDA, Z. . . . 216
KÖNIG, E., KREMER, S.: Theory of Magnetism Close to the $^5T_2 - {}^1A_1$ Crossover in Iron (II) Complexes. I. Semi-Empirical Analysis Including Axial Field Distortions . . . 143
KOLLMAR, H., SMITH, H. O.: The Electronic Structure of Carbonium Ions . . . 65
KREMER, S., s. KÖNIG, E. . . . 143

LELI, R., s. BOSSA, M., et al. . . . 299
LUDI, A., s. RÜEGG, M. . . . 193

MACLEAN, C., s. JAGER, G. DE, et al. . . . 57
MARTIN, J. E., ADAMSON, A. W.: Photosensitized Aquation Reactions of $Cr(NH_3)_5(NCS)^{2+}$ 119
MCDIARMID, R.: Calculation of the Energies of the Lower Excited States of CH_3 . . . 282
MEYER, A. Y., KESTEN, Y.: Multi-Conformational Compounds with Two Absorbing Groups. V. The MIM Approach to α-Diketones . . . 352

NEELY, W. B., s. GORALSKI, C. T. . . . 41

OZIAS, Y., REYNARD, L.: Recherches sur la structure électronique de composés soufrés (Methode LCAO améliorée). II. Thiocarbonates et dithiocarbamate: Effet de substitution de l'oxygène par le soufre . . . 51

PAPULA, L., s. HARTMANN, H., et al. . . . 243
PETRONGOLO, C., s. BONACCORSI, R., et al. . . . 331
— s. COLOMBETTI, G. . . . 31
PFAFFENBERGER, C. R. C., s. DAVIS, R. E. . . . 364
PFEIL, A.: Vibrational Analysis of the Raman, Infrared and Electronic Spectra of Hexafluoromanganate (IV) . . . 159
PORTER, G. B., CHEN, S. N., SCHLÄFER, H. L., GAUSMANN, H.: Excited States in the Photochemistry of Chromium(III) Complexes . . . 81
PULLMANN, A., s. GIESSNER-PRETTRE, C. . . . 378

RAMUNNI, G., s. BOSSA, M., et al. . . . 299
REYNARD, L., s. OZIAS, Y. . . . 51
RICHARDSON, J. W., VAUGHT, D. M.: Semi-Asymptotic Evaluation of Certain Three-Center Two-Electron Integrals . . . 394
ROOS, B., VEILLARD, A., VINOT, G.: Gaussian Basis Sets for Molecular Wavefunctions Containing Third-Row Atoms . . . 1
ROS, P., s. DEJAGER, G., et al. . . . 57
RÜEGG, M., LUDI, A.: The Structure and Spectra of Bis(ethylenediamine)nickel(II)-Tetracyanopalladate(II), $Ni(NH_2CH_2CH_2NH_2)_2Pd(CN)_4$ . . . 193

SALAHUB, D. R., SANDORFY, C.: CNDO, INDO and RCNDO-CI Calculations on the Electronic Spectra of Saturated Hydrocarbons . . . 227
SANDORFY, C., s. SALAHUB, D. R. . . . 227
SCHLÄFER, H. L., s. PORTER, G. B., et al. . . . 81
SCHMIDTKE, H.-H.: Das "Angular Overlap"-Modell für niedersymmetrische Koordinationsverbindungen. II. Zweikernige Komplexe mit einer linearen Sauerstoff-Brücke [1] 92
SCROCCO, E., s. BONACCORSI, R., et al. . . . 331
SELTZER, S., s. EHRENSON, S. . . . 17
SHANSHAL, M.: The Rotation Barrier of the Cyclopropylcarbinylcation . . . 405
SHEPARD, W. N., FORSTER, L. S.: The $^2E \leftrightarrow {}^4A_2$ Transition in Tetragonal Cr^{3+} Complexes 135
SIMONETTA, M., s. GAMBA, A., et al. . . . 12
SMITH, H. O., s. KOLLMAR, H. . . . 65
STREHL, W., s. HARTMANN, H., et al. . . . 243
SVENDSEN, E. N., s. HANSEN, AA. E. . . . 303

TANTARDINI, G. F., s. GAMBA, A., et al. . . . 12
TOMASI, J., s. BONACCORSI, R., et al. . . . 331
TYUTYULKOV, N., FRATEV, F., IVANOVA, M.: Quantum Chemical Investigation of the Electron Structure, Physical Properties and the Reactivity of π-Electron Molecules in Excited Singlet and Triplet States. VI. Electron Structure and Dipole Moments in Excited States of Nonalternant Hydrocarbons . . . 385

VAUGHT, D. M., s. RICHARDSON, J. W. 394
VEILLARD, A., s. ROOS, B., et al. 1
VINOT, G., s. ROOS, B., et al. 1

WASGESTIAN, H. F., HAMMOND, G. S.: Triplettlöschung durch Chrom(III)-Komplexe . 186
WITZKE, H.: Semi-Empirical Evaluations of the Racah *B* and *C* Parameters from the Crystal Field Spectra of Chromium(III) Complexes 171
WORMER, P. E. S., s. CHESNUT, D. B. 250

YEN, T. F.: Resonance Topology of Polynuclear Aromatic Hydrocarbons 399
YOSHIDA, Z., KOBAYASHI, T.: Electronic Spectra and Structures of Organic π-Systems. II. SCF MO Calculations of Five- and Six-Membered Heterocyclic Systems, Quinones, Tropone, Tropolone and Sulphur-Containing Systems with the Variable Integrals Methods 216

ZAHRADNÍK, R., s. ČÁRSKY, P. 343

Recenciones

LÖWDIN, P. O.: Advances in Quantum Chemistry 5. (Ref. K. Jug) 412
POPLE, J. A., BEVERIDGE, D. L.: Approximate Molecular Orbital Theory. (Ref. K. JUG) 80
WOODWARD, R. B., HOFFMANN, R.: The Conservation of Orbital Symmetry. (Ref. H.-H. Schmidtke) 411

Indexed in Current Contents

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 4 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 120.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 4 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 120.—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît à de courts intervalles, suivant les articles reçus. En général un volume se compose de 4 fascicules. Le prix de chaque volume est de 120 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscrit accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que des ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . . , des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis pas la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 20 Fasc. 4

Index

Commentationes

HANSEN, AA. E., SVENDSEN, E. N.: On the Importance of Scale and Polarization of the Atomic Orbital Basis for LCAO Calculations of Electronic Intensities 303

COPELAND, D. A., BALLHAUSEN, C. J.: An Unrestricted CNDO-MO Calculation of VCl_4 . . 317

BONACCORSI, R., PETRONGOLO, C., SCROCCO, E., TOMASI, J.: Theoretical Investigations on the Solvation Process. I. A Simple Model for the Dimeric Water Associate 331

ČÁRSKY, P., ZAHRADNÍK, R.: Conjugated Radicals. XII. CNDO Calculations on the Electronic Spectra of Eutadiene Cation and Anion Radicals 343

MEYER, A. Y., KESTEN, Y.: Multi-Conformational Compounds with Two Absorbing Groups. V. The MIM Approach to α-Diketones 352

DAVIS, R. E., PFAFFENBERGER, C. R. C.: The Carbonyl Frequency of Cyclopentanone as a Function of Its Distortion, a Vibrational Model for 2- and 7-Norbornanone 364

FLURRY, R. L., JR., BREEN, D., HOWLAND, D. L.: Overlap Partitioning as a Tool for Predicting Molecular Rearrangements 371

GIESSNER-PRETTRE, C., PULLMAN, A.: Configuration Mixing Involving σ and π Orbitals. IV. Introduction of the Neglected Configurations by Second-Order Perturbation Theory 378

TYUTYULKOV, N., FRATEV, F., IVANOVA, M.: Quantum Chemical Investigation of the Electron Structure, Physical Properties and the Reactivity of π-Electron Molecules in Excited Singlet and Triplet States. VI. Electron Structure and Dipole Moments in Excited States of Nonalternant Hydrocarbons 385

Relationes

RICHARDSON, J. W., VAUGHT, D. M.: Semi-Asymptotic Evaluation of Certain Three-Center Two-Electron Integrals 394

TEH FU YEN: Resonance Topology of Polynuclear Aromatic Hydrocarbons 399

SHANSHAL, M.: The Rotation Barrier of the Cyclopropylcarbinylcation 405

HIRST, D. M.: Calculation of ^{14}N Hyperfine Coupling Constants by the INDO-MO Method 409

Recensiones

WOODWARD, R. B., HOFFMANN, R.: The Conservation of Orbital Symmetry. (Ref. H.-H. Schmidtke) 411

LÖWDIN, P. O.: Advances in Quantum Chemistry 5. (Ref. K. Jug) 412

Indexed in Current Contents

Responsible for advertisements: Edgar Seidler, D-1000 Berlin 15, Kurfürstendamm 237

Telephone (0311) 883 37 55, Telex: 01-82 811

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Printed in Germany by Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

© by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1971